

ESTIMACIÓN DE LAS EMISIONES BIOGÉNICAS Y ANTROPOGÉNICAS PARA UN EJERCICIO DE MODELIZACIÓN FOTOQUÍMICA EN EL SUR-OESTE DE LA PENÍNSULA IBÉRICA.

Núria CASTELL BALAGUER, Enrique MANTILLA IGLESIAS y
Rosa SALVADOR POLO
Fundación Centro de Estudios Ambientales del Mediterráneo (CEAM)
nuria@ceam.es

RESUMEN

La modelización mediante el uso de modelos químicos y de transporte supone una herramienta eficaz para la toma de decisiones por parte de los encargados de la gestión medioambiental. La estimación de las emisiones, biogénicas y antropogénicas, supone una pieza clave, ya que proporciona al modelo químico el escenario potencial de emisiones. La modelización de las emisiones requiere tener en consideración diferentes aspectos, principalmente relativos a la desagregación temporal, la distribución espacial y la especiación química de los datos, para su posterior utilización como entrada en un modelo físico-químico. En este trabajo se presenta un modelo de emisiones que proporciona una estimación de las emisiones antropogénicas (tráfico e industrias) y biogénicas para el área de Huelva-Sevilla. La estimación de las emisiones se utilizó en un ejercicio de modelización fotoquímica realizado sobre el área de estudio.

Palabras clave: modelización emisiones, antropogénicas, biogénicas, desagregación temporal, distribución espacial, especiación química

ABSTRACT

Chemical and Transport Models (CTM) are useful tools for Air Quality Authorities trying to evaluate the efficiency of an emission control strategy. Emission Models are key components, because they provide to CTM 3D fields describing features of pollutant emissions. An Emission Model processes different information to convert emissions to the resolution required by the CTM. In particular the Emission Model must perform the temporal modulation, the spatial allocation, and the chemical speciation. In this work an Emission Model for Huelva-Sevilla area is presented. The inventory includes biogenic and antropogenic (on-road traffic and industrial) sources.

Key words: emission model, biogenic, antropogenic, temporal modulation, spatial allocation, chemical speciation

1. INTRODUCCIÓN

La atmósfera es un sistema físico-químico complejo, en el que se suceden una gran diversidad de reacciones químicas y las masas aéreas son transportadas en función de las condiciones meteorológicas y orográficas de la zona. La emisión de compuestos químicos gaseosos, tanto

procedentes de fuentes naturales como de fuentes antropogénicas, supone la introducción de compuestos reactivos a la atmósfera, que tendrán un impacto sobre diferentes problemas ambientales, como la degradación de la calidad del aire, la exposición a compuestos contaminantes de seres humanos, vegetación y materiales, el cambio climático, etc.

La simulación realista del impacto de las emisiones gaseosas en una determinada zona parte necesariamente de la utilización de herramientas de modelización de última generación capaces de reproducir con suficiente realismo los diferentes procesos involucrados, así como de la mejor información de base disponible.

En la actualidad, se considera que la mayor incertidumbre en la estimación de las concentraciones de contaminantes secundarios (como es el caso del ozono), se encuentra en la estimación de las emisiones, tanto cualitativa como cuantitativamente (en tanto que constituyen la base de toda la reactividad química); de esta manera, sería razonable pensar que la mejora de la evaluación de las concentraciones de ozono y otros compuestos químicos pasa en gran medida por una mejora de la estimación de las emisiones.

Para que el modelo de emisiones pueda servir de entrada a la modelización fotoquímica, es necesario realizar una estimación de las emisiones en cada una de las celdas del dominio de los diferentes compuestos químicos que intervienen en la fotoquímica atmosférica, como por ejemplo, los óxidos de nitrógeno (NO_x), los compuestos orgánicos volátiles (VOC), el dióxido de azufre (SO_2), y el ácido nítrico (NH_3).

El modelo de emisiones incluye las emisiones de la vegetación, del tráfico vehicular y de las industrias. La estimación de las emisiones se realizó para los tres dominios anidados que posteriormente se emplearían en el modelo fotoquímico. Un dominio que cubre la Península Ibérica (resolución de 24km), un dominio que cubre el Sur-Oeste peninsular (resolución de 6km) y un dominio que cubre la zona de Huelva-Sevilla (resolución de 2km). En todos los dominios la resolución temporal es horaria.

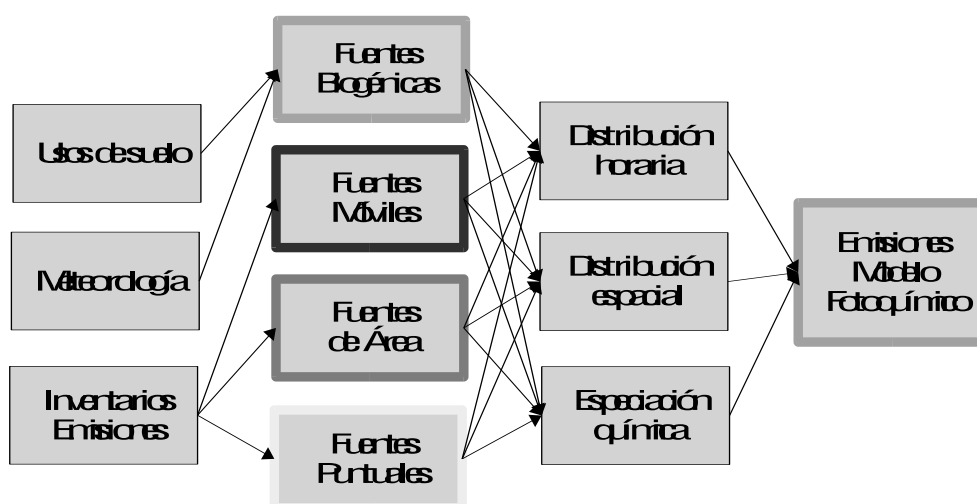


Fig. 1: Descripción del esquema de procedimiento empleado en el cálculo de las emisiones.

ESTIMACIÓN DE LAS EMISIONES BIOGÉNICAS Y ANTROPOGÉNICAS PARA UN EJERCICIO DE MODELIZACIÓN FOTOQUÍMICA EN EL SUR-OESTE DE LA PENÍNSULA IBÉRICA

La especiación química de las emisiones se realizó de acuerdo a las propuestas por los organismos Europeos y Americanos, y siempre teniendo en cuenta los mecanismos químicos integrados en los modelos de tercera generación.

De esta forma, la modelización de las emisiones, tanto de origen biogénico como antropogénico, requiere partir de unos datos de entrada (meteorología, usos de suelo, características de la industria, etc.), aplicar una metodología o algoritmo de cálculo, de forma que obtengamos la estimación de las especies químicas necesarias para la modelización fotoquímica, en la resolución espacial y temporal adecuada. En la figura 1 se resume dicho procedimiento.

2. DATOS DE ENTRADA Y METODOLOGÍA

El modelo genérico para la estimación de las emisiones gaseosas de una fuente determinada, puede escribirse como el producto de dos variables, el nivel de la actividad i que produce la emisión del contaminante j (A_{ij}); y el factor de emisión del contaminante j (EF_{ij}) (EEA, 2003):

$$E_{ij} = A_{ij} \cdot EF_{ij}$$

No obstante, generalmente, la estimación de las emisiones es más complejo, ya que las emisiones dependen de otras variables. Así por ejemplo, las emisiones vehiculares dependen de la velocidad, tipo de combustible, etc. Se desarrolló un modelo de emisiones para tres tipos de fuentes diferenciadas: biogénicas, vehiculares e industriales. En la figura 2 se muestra el esquema seguido en el desarrollo del modelo de emisiones.

2.1. Modelización de las emisiones biogénicas

Para el modelo de emisiones biogénicas se utilizó el algoritmo de GUENTER *et al.* (1993), convenientemente adaptado a las peculiaridades de la Península Ibérica. Este algoritmo incorpora factores de emisión por usos de suelo e información meteorológica.

Para conocer la cobertura de uso de suelo para cada uno de los dominios de estudio, se utilizaron los datos procedentes del proyecto CORINE, con una resolución aproximada de 1km (0.0083 grados). Debido a la falta de datos de factores de emisión y biomasa que diesen cobertura a los diferentes dominios de trabajo (peninsular, regional y provincial), se recurrió a los datos recopilados en trabajos anteriores para el área de la Comunidad Valenciana y Catalunya (GOMEZ, 1998). Estos factores de biomasa y emisión, estimados para cada mes del año, se asignaron a cada una de las celdas de 1km x 1km.

Las emisiones biogénicas dependen directamente de las condiciones meteorológicas, concretamente de la radiación y la temperatura. Para incorporar las variables meteorológicas procedentes del modelo meteorológico (con resolución horaria) a los datos de la malla de 1kmx1km se siguió un enfoque *bottom-up*, en el que el valor total de la emisión se obtiene por la agregación de las estimaciones efectuadas para cada celda. De esta forma, se estimaron las emisiones biogénicas de isopreno, monoterpenos y OVOC para los dominios de 24, 6 y 2km.

La especiación química se elaboró siguiendo las categorías definidas en el mecanismo *Carbon Bond 4* (CB4). El isopreno dentro de la categoría ISOP (isopreno). Los monoterpenos se distribuyen en ALD2 (acetaldehído y otros aldehídos pesados), OLE (enlace olefinico C=C) y

PAR (enlace parafínico C-C). Los OVOC se distribuyen en las categorías OLE, PAR y NR (compuestos no reactivos). Los monoterpenos también se distribuyeron en la categoría TERPB (monoterpenos) utilizada para estudios de formación de aerosoles.

2.2. Modelización de las emisiones de tráfico

Como estimación de las emisiones de tráfico correspondientes a los dominios exteriores, 24 y 6km, se tomaron los datos ofrecidos por el proyecto europeo EMEP/CORINAIR.

Para el dominio de mayor resolución, 2km, el modelo de emisiones de tráfico incluyó las emisiones en caliente, en frío y evaporativas, teniendo en cuenta el parque de vehículos, la distribución y velocidades por tipos de vías, las distancias medias recorridas, el consumo de combustible, las características de los combustibles y las temperaturas ambientales mínimas y máximas. Todos estos datos se procesaron siguiendo la metodología EMEP/CORINAIR (EEA, 2003), con el programa proporcionado por dicho proyecto, COPERT III, obteniéndose los resultados en toneladas/año para la zona de estudio, y para las siguientes especies químicas: NO_x, SO₂, CO, y NMVOC (compuestos orgánicos volátiles distintos al metano).

Una vez estimadas las emisiones totales para el área de estudio, se realizó la desagregación espacial (enfoque *top-down*), siguiendo la configuración de la red vial, y realizando la distinción entre tres tipos de vías: urbana, carretera y autopista.

Para la desagregación temporal se consideró una distribución mensual homogénea, y para la distribución horaria se emplearon perfiles horarios de intensidad de tráfico. Los perfiles considerados son promedios de los datos de intensidad medidos y presentados en DELGADO (1997). Se emplearon dos tipos de perfiles, uno característico de los días festivos y otro de los días laborables.

En la especiación química de los NMVOC se utilizaron los diferentes perfiles químicos en función de las categorías de vehículos, definidos por NTZIACHRISTOS (2000). Posteriormente se procedió a determinar el aporte por especie a cada una de las categorías del mecanismo CB4.

2.3. Modelización de las emisiones industriales

Al igual que en el caso de las emisiones de tráfico, para las dos mallas exteriores (Peninsular y Andalucía) se emplearon las emisiones propuestas y calculadas dentro del marco del proyecto europeo EMEP, una vez convenientemente adaptadas a la resolución y proyección geográfica.

En el dominio de la zona de Huelva-Sevilla, las emisiones industriales incluyeron registros reales de emisión de las industrias más importantes del entorno de la Ría de Huelva. El carácter anual de dichos registros hizo necesario definir un perfil temporal atendiendo a las características de cada una de las empresas.

Las emisiones de origen industrial se dividieron en dos tipos: superficiales (o de área) y puntuales. Las primeras proceden de fuentes difusas, y se asume que están distribuidas dentro de una zona geográfica establecida. Es este el caso de pequeñas y medianas industrias que no tienen chimeneas altas. Las fuentes puntuales, se calculan de forma individualizada para una determinada industria, ya que debido a su tamaño, producción, grado contaminante, etc. es

ESTIMACIÓN DE LAS EMISIONES BIOGÉNICAS Y ANTROPOGÉNICAS PARA UN EJERCICIO DE MODELIZACIÓN FOTOQUÍMICA EN EL SUR-OESTE DE LA PENÍNSULA IBÉRICA

necesario una cuantificación específica. Su posición geográfica está bien definida y el modelo fotoquímico tiene un tratamiento especial para este tipo de fuentes. Es el caso de, por ejemplo, las centrales térmicas de producción eléctrica.

Posteriormente se realizó la especiación química de las emisiones horarias atendiendo a la especiación genérica propuesta por la Agencia de Protección Ambiental Americana (EPA), que recoge más de 100 tipologías de empresas.

2.4. Ajuste del modelo de emisiones

El ajuste del modelo de emisiones consistió básicamente en la comparación de los resultados obtenidos mediante el modelado, con los resultados obtenidos en otras fuentes. De esta forma, se realizaron dos comparaciones principales:

- Comparación con los datos ofrecidos por el Inventario de Emisiones de Andalucía para el año 2001. Notar que el inventario de emisiones tiene una resolución espacial provincial, y una resolución temporal anual, mientras que la estimación de las emisiones tiene una resolución espacial de 2km y una resolución temporal horaria.
- Comparación de ordenes de magnitud con los resultados de emisiones obtenidas en otras Comunidades Autónomas. Puesto que las emisiones varían en función de la meteorología, de la localización geográfica, de la configuración de la red vial y también de la tipología industrial, la comparación con datos procedentes de otras regiones (aunque tengan una mejor resolución espacial y temporal que en un inventario de emisiones) es siempre limitado.

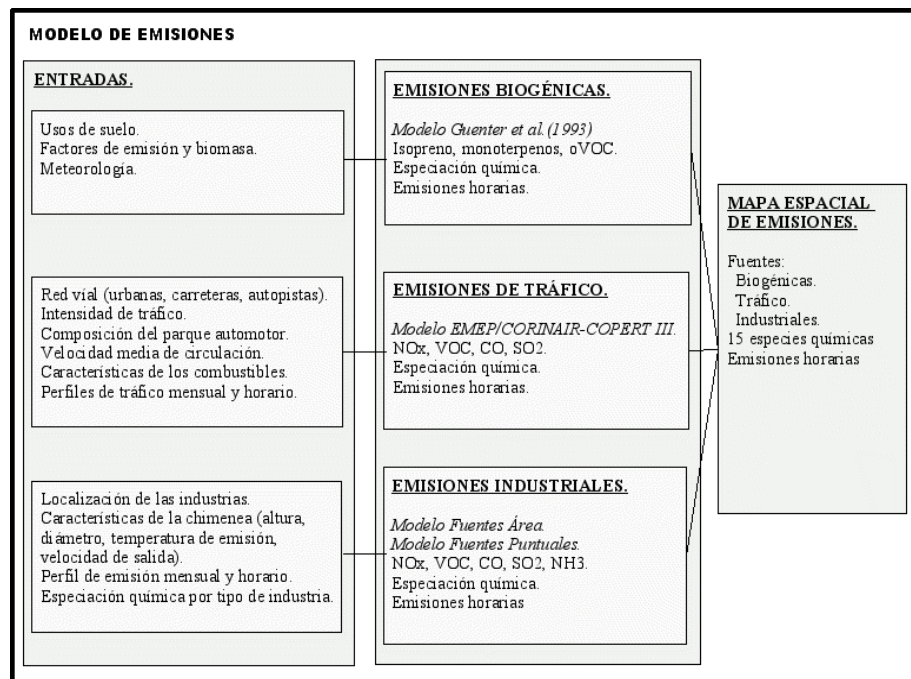


Fig 2: Esquema de cálculo (entrada y salida) del modelo de emisiones.

3. RESULTADOS

Para el ejercicio de modelización fotoquímica se escogieron dos periodos en los que las condiciones meteorológicas fuesen distintas, pero que diesen lugar a niveles altos de ozono en el área de Huelva-Sevilla. Las características del ozono hacen que sus niveles sean más altos durante los meses de verano, en los que hay más horas de sol (concretamente radiación solar ultravioleta) y las condiciones meteorológicas favorecen la recirculación y el estancamiento de la masa aérea. Los periodos escogidos fueron: del 10 al 16 de agosto de 2003, y del 15 al 19 de junio de 2004.

3.1. Emisiones biogénicas

La vegetación constituye una fuente importante de compuestos orgánicos volátiles, la elevada reactividad de algunos de estos compuestos, hace necesaria su consideración en la formación de ozono. En la literatura científica reciente se encuentran diferentes estudios que ahondan en la relación entre las emisiones biogénicas y la contaminación por ozono (TAO, 2003) (THUNIS, 2000).

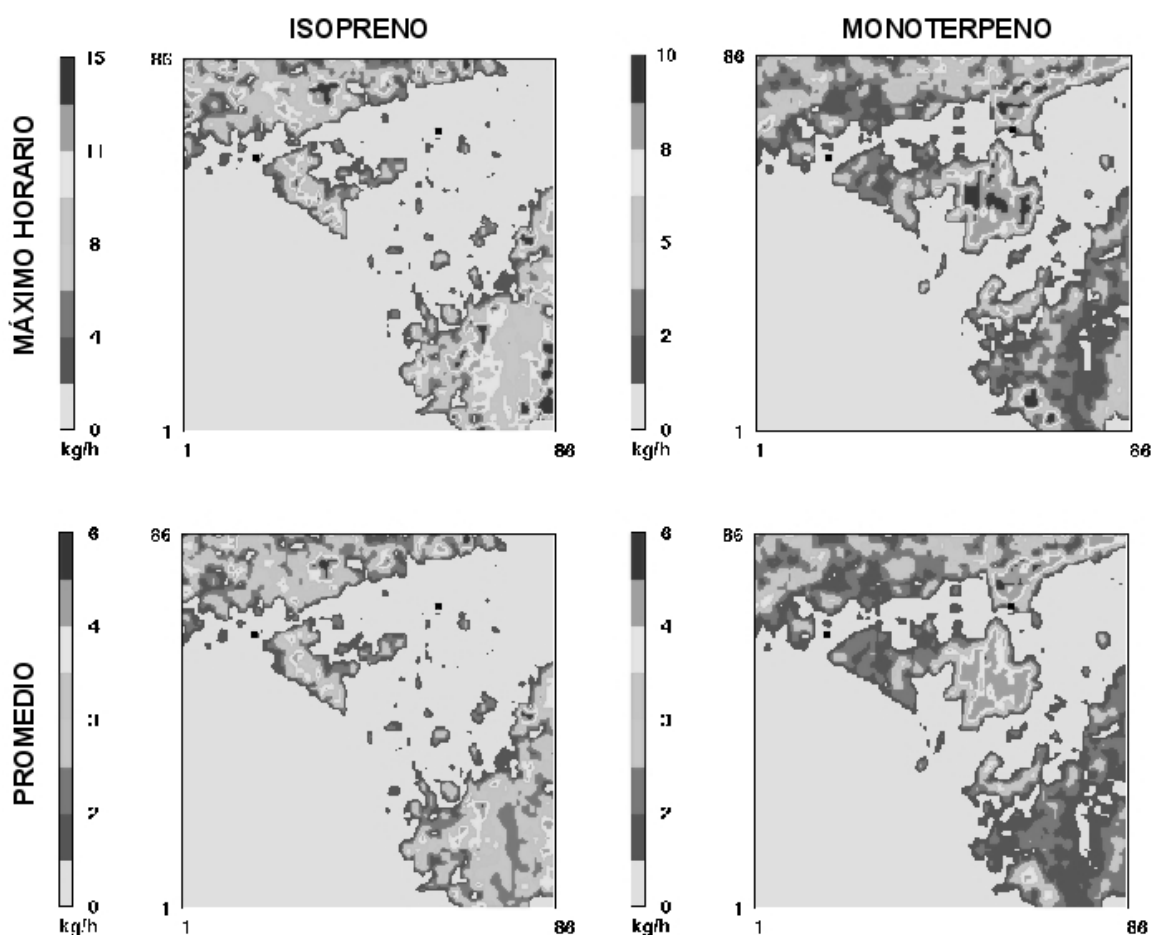


Fig 3: Mapa de emisiones biogénicas para el episodio del 10 al 16 de agosto de 2003 (resolución 2km). Se representan los valores máximos y promedios para isopreno y monoterpeno; los cuadrados negros representan de izquierda a derecha, las ciudades de Huelva y Sevilla.

ESTIMACIÓN DE LAS EMISIONES BIOGÉNICAS Y ANTROPOGÉNICAS PARA UN EJERCICIO DE MODELIZACIÓN FOTOQUÍMICA EN EL SUR-OESTE DE LA PENÍNSULA IBÉRICA

GUENTHER (1995) atribuye un 92, 88 y 77 % de las emisiones de isopreno, monoterpenos y OCOV, respectivamente, a la biomasa foliar. Un 8, 10 y 8 % de las emisiones de isopreno, monoterpenos y OCOV, respectivamente, se atribuye al suelo. Un 14% de las emisiones de OCOV son de origen antropogénico, y las emisiones de isopreno y monoterpenos antropogénicas son despreciables.

Las figuras 3 y 4 muestran las emisiones biogénicas, concretamente las emisiones de isopreno y monoterpeno, para los dos episodios. Se representan el máximo horario de cada episodio, y el valor promedio. La diferencia en las emisiones entre los dos episodios se debe a la dependencia con la radiación solar y la temperatura.

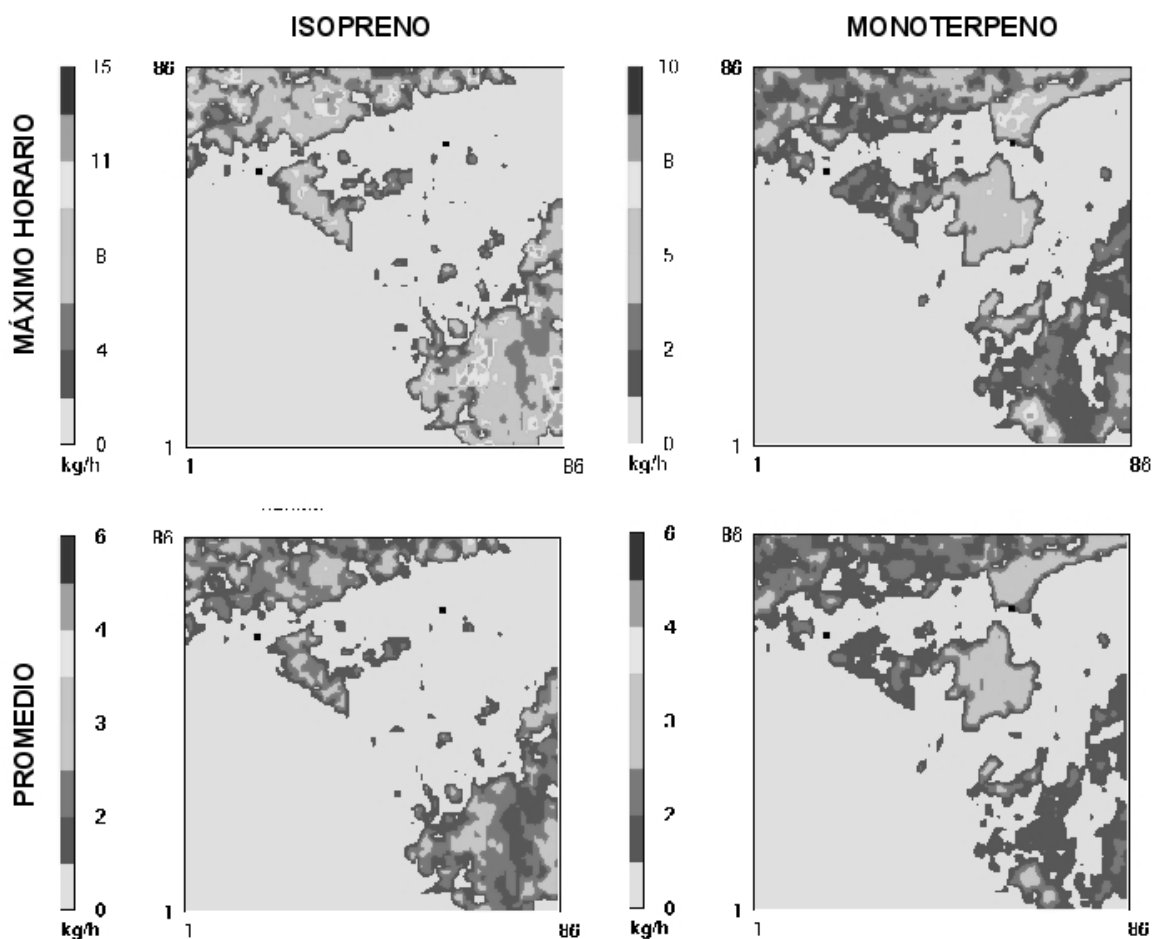


Fig 4: Mapa de emisiones biogénicas para el episodio del 15 al 19 de junio de 2004 (resolución 2km). Se representan los valores máximos y promedios para isopreno y monoterpeno; los cuadrados negros representan de izquierda a derecha, las ciudades de Huelva y Sevilla.

El isopreno es emitido por las plantas cuando están expuestas a la radiación solar. Las emisiones son mayores cuando aumenta la temperatura, pero sólo hasta cierto valor. Su formación y emisión está directamente relacionada con la fotosíntesis.

Los monoterpenos constituyen un grupo del que se conocen más de 1000 estructuras. Su emisión solo depende de la temperatura, por lo que son emitidos por las plantas aún en ausencia de radiación solar.

En el cálculo de las emisiones biogénicas buena parte de la incertidumbre procede del factor de emisión, ya que la gran diversidad vegetal y la compleja interacción con los factores meteorológicos implican una elevada incertidumbre en la estimación de este tipo de emisiones.

SIMPSON *et al.* (1995) presenta una valoración de las emisiones biogénicas para Europa, indicando que un factor 3 constituye un límite mínimo para la incertidumbre de las emisiones totales en el ciclo anual. Indica también que es probable que los factores de incertidumbre sean sustancialmente mayores (entre 5 y 10) para el caso de valoraciones episódicas. Estas estimaciones coinciden con la aportada por el Inventario de Emisiones de Andalucía para el año 2003, donde se indica un rango de incertidumbre del 100 al 300% para las emisiones biogénicas.

3.2. Emisiones de tráfico

El tráfico, y específicamente el tráfico vehicular, es el responsable de una emisión importante de gases contaminantes a la atmósfera. Las emisiones debidas al tráfico representan una fuente importante de monóxido de carbono (CO), de óxidos de nitrógeno (NO_x), y en menor medida de compuestos orgánicos volátiles (VOC).

En la figura 5 se representa el máximo horario y el promedio de las emisiones de CO y NO_x. Se observa que las emisiones más importantes se encuentran en la carretera principal que une Huelva con Sevilla, y Sevilla con Cádiz.

La gran cantidad de elementos que determinan las emisiones reales del tráfico vehicular es muy grande, por lo que debido a la limitación en el nivel de conocimiento o a la falta de información, el modelado de emisiones de tráfico tiene un elevado grado de incertidumbre. COLVILLE *et al.* (2001) indica que en el período anual, los inventarios pueden presentar factores de incertidumbre de hasta un factor 2, para una zona que corresponda con una ciudad completa, pudiendo aumentar para tramos específicos de vías y en escalas menores de tiempo hasta un factor 10. KUHLEIN y FRIEDRICH (2000) asignan un factor de incertidumbre de 1.5 para un inventario anual de las emisiones de NO_x y VOC de la zona oeste de Alemania.

En el Inventario de Emisiones atmosféricas de Andalucía se asocia un rango de error típico del 50 al 150% al tráfico rodado, y de hasta el 300% para el caso de otras fuentes móviles y maquinaria.

3.3. Emisiones industriales

Huelva es uno de los centros industriales más importantes dentro de España, con una amplia variedad de industrias, que comprenden desde industrias químicas a industrial alimenticias.

Como puede observarse en la figura 6, las emisiones industriales quedan confinadas en el entorno próximo a la ciudad de Huelva, y proceden de tres polígonos industriales: Tartessos (San Juan del Puerto), Nuevo Puerto (Palos de la Frontera), y Punta del Sebo (Huelva). Estos

ESTIMACIÓN DE LAS EMISIONES BIOGÉNICAS Y ANTROPOGÉNICAS PARA UN EJERCICIO DE MODELIZACIÓN FOTOQUÍMICA EN EL SUR-OESTE DE LA PENÍNSULA IBÉRICA

polígonos representan una fuente importante tanto de óxidos de nitrógeno como de compuestos orgánicos volátiles.

La diversidad y complejidad del sector industrial se refleja en la dificultad para la estimación de sus emisiones, que requiere de información específica de cada centro industrial: tipo y cantidad de combustibles consumidos, niveles de producción, calendarios laborales, etc.

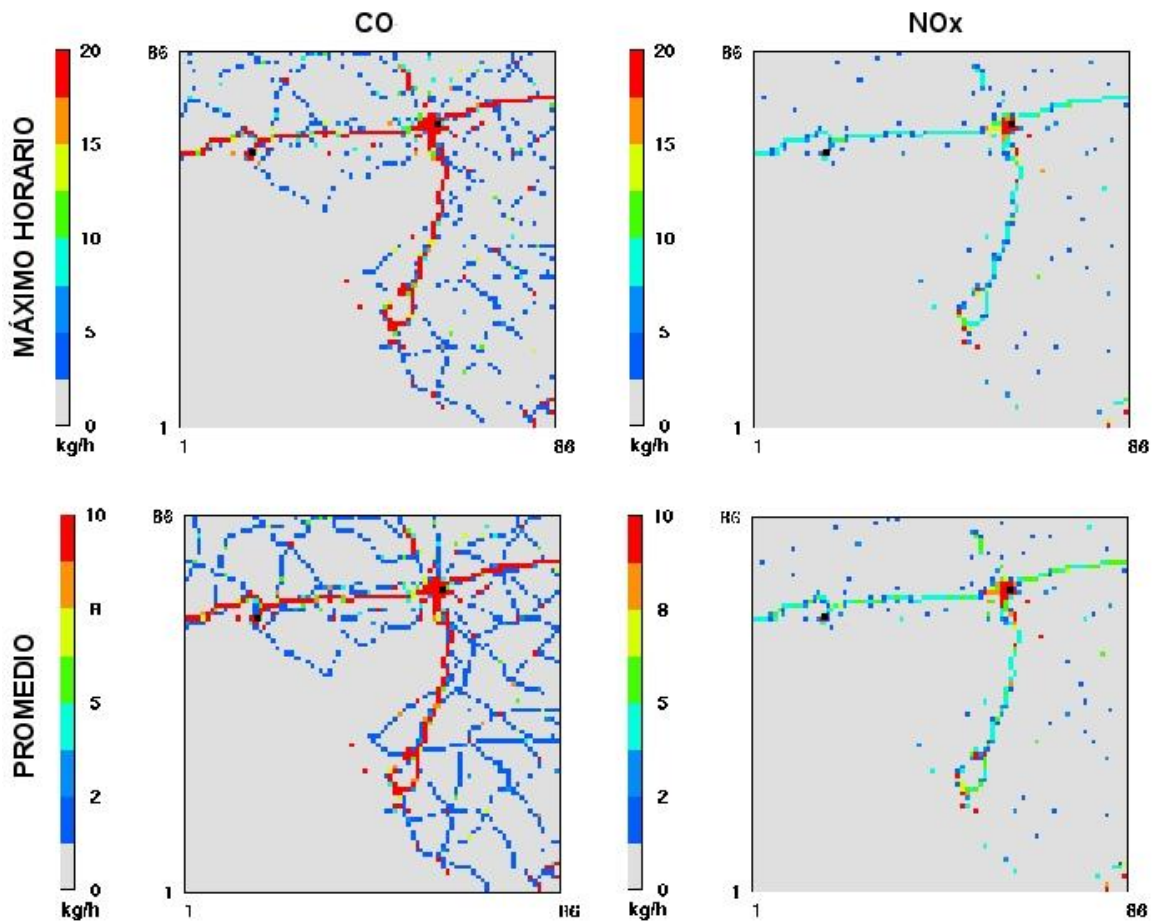


Fig 5: Mapa de emisiones de tráfico (resolución 2km). Se representan los valores máximos y promedio para el monóxido de carbono y los óxidos de nitrógeno ($\text{NO}_x = \text{NO}_2 + \text{NO}$). Las escalas de emisión de han ajustado para poder representar las carreteras de menor tráfico. De esta forma para el caso del CO, la emisión máxima horaria es de 106 kg/h, y la media de 64kg/h; para el caso del NO_x , la máxima es de 28 kg/h, y la media de 17 kg/h. Los cuadrados negros representan de izquierda a derecha, las localidades de Huelva y Sevilla, respectivamente.

En el Inventario de Emisiones de Andalucía para el año 2003 se asocia un error del 50 al 150% para la emisión de óxidos de nitrógeno y VOC.

4. CONCLUSIONES

La metodología descrita para la realización del modelo de emisiones permite cubrir tanto los dominios de menor resolución, como los dominios de alta resolución espacial. El modelo se ha dividido en tres submodelos: biogénico, tráfico e industrial, de forma que se pudiese simular de la forma más realista posible la contribución de los distintos tipos de fuentes.

Para la especiación de las emisiones se empleó el mecanismo químico Carbon Bond 4, uno de los mecanismos más ampliamente utilizado en la literatura científica, e integrado en la mayoría de los modelos fotoquímicos.

El modelo combina el enfoque *bottom-up*, y el *top-down*, dependiendo de la información existente para cada una de las resoluciones espaciales.

La estimación horaria de las emisiones, y la integración de los compuestos químicos que intervienen en la formación fotoquímica de ozono, permiten su integración en modelos fotoquímicos de última generación, como el CAMx o el CMAQ.

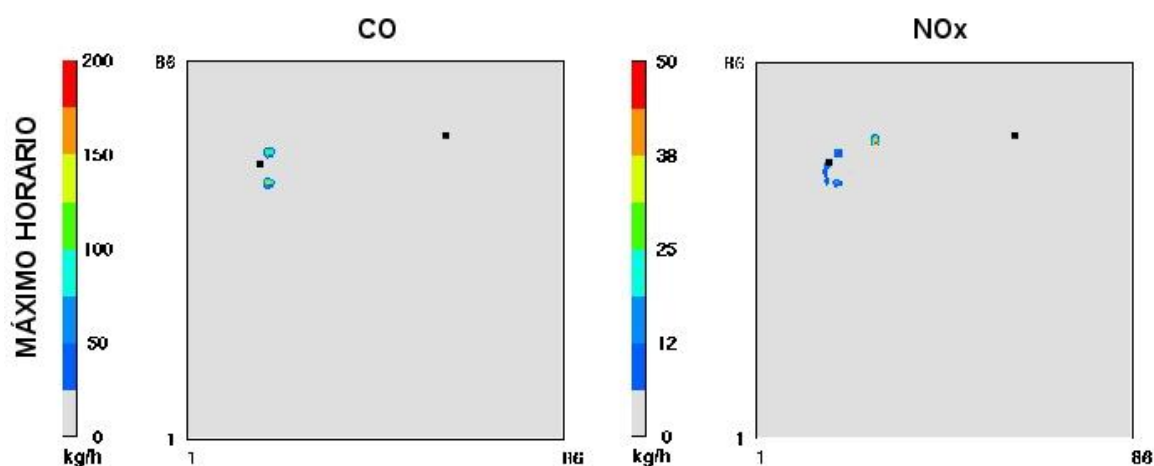


Fig 6: Mapa de emisiones industriales (resolución 2km). Se representan los valores de emisiones horarias para monóxido de carbono y óxidos de nitrógeno (NO + NO₂). Los cuadrados negros representan de izquierda a derecha, las localidades de Huelva y Sevilla, respectivamente.

5. AGRADECIMIENTOS

El presente trabajo se realizó dentro del marco del proyecto “Profundización en el Diagnóstico de la Situación Ambiental del Entorno de la Ría de Huelva” financiado por la Junta de Andalucía y coordinado por el CSIC.

El CEAM esta cofinanciado por la Generalitat Valenciana y Bancaixa. Las simulaciones meteorológicas se han llevado a cabo en el Centre de Supercomputació de Catalunya (CESCA).

6. REFERENCIAS

- COLVILE R., HUTCHINSON, E.J., MINDELLI, J.S. and WARREN R.F. (2001). "The transport sector as a source of air pollution". *Atmospheric Environment*, 35, pp. 1537-1565.
- EEA (2003). EMEP/CORINAIR Atmospheric Emissions Inventory Guidebook 3rd edition. September 2003 update. UNECE/EMEP Task Force on Emission Inventory. Technical report nº30.
- EMEP: Monitoring and Evaluation of Long-range Transmission of Air Pollutants in Europe. [Http://www.emep.int](http://www.emep.int).
- EPA: U.S. Environmental Protection agency. Emission inventory related codes. <http://www.epa.gov/ttn/chief/codes/>
- EPA: U.S. Environmental Protection agency. Speciation. <http://www.epa.gov/ttn/chief/emch/speciation/index.html>
- GOMEZ, O. 1998. "Estimación de las emisiones de compuestos orgánicos volátiles biogénicos de origen terrestre para Cataluña". *Tesis doctoral*. Universitat Politècnica de Catalunya.
- GUENTER A., HEWITT D.N, ERICKSON D., FALL R., GERON C., GRAEDEL T., HARLEY P., KLINGER L., LERDAU M., McKAY W.A., PIERCE T., SCHOLLES B., STEINBRECHER R., TALLAMRAJU R., TAYLOR J., ZIMMERMAN p. (1995). "A global model of natural volatile organic compound emissions". *Journal of Geophysical Research*, 100(D5), pp 8873-8892.
- Inventario de Emisiones de Andalucía para el año 2003. (2004). Editado por la Junta de Andalucía.
- KULLWEIN, J. and FRIEDRICH, R. (2000). "Uncertainties of modelling emissions from road transport". *Atmospheric Environment*, 34, pp. 4603-4610.
- SIMPSON, D., GUENTHER, A., HEWITT, C. N, STEINBRECHER, R. (1995). "Biogenic emissions in Europe. Estimates and uncertainties". *Journal of Geophysical Research*, 100 (D11), pp. 22875- 22890.
- TAO A., LARSON, S.M., WUEBBLES, D.J., WILLIAMS A., CAUGHEY, M. (2003). "A seasonal simulation of biogenic contributions to ground-level ozone over the continental United States". *Journal of Geophysical Research*, 108(D14), ACH2, 1-15.
- THUNIS P., CUVILIER, C. (2000). "Impact of biogenic emissions on ozone formation in the Mediterranean area – a BEMA modelling study". *Atmospheric Environment*, 34, pp. 467-481.